



TITLE:

3. Solution of the Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker Equation with a Gradient Correction to the Exchange

AUTHOR(S):

片岡, 俊幸

CITATION:

片岡, 俊幸. 3. Solution of the Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker Equation with a Gradient Correction to the Exchange. 物性研究 1988, 50(6): 1109-1110

ISSUE DATE:

1988-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93289>

RIGHT:

と思われる。

2. Rotary saturation 法による NaCl 単結 晶中の多光子吸収過程の研究

田 中 雅 夫

我々は NaCl 単結晶中の Na 核 (核スピン, $I = 3/2$) について, Rotary saturation 法を用いて多光子吸収過程の観測を行った。Rotary saturation 法は固体の核磁気共鳴において, 多光子吸収過程の観測を可能にする方法であり, マジック角 (約 54.7 度) 付近での共鳴吸収線の極端な先鋭化により, 1 次, 2 次及び 3 次の吸収線が観測できた。

スピンのエネルギー準位間の遷移確率を計算して, この吸収スペクトルの線型, 線幅及び Audio 磁場の照射時間に対する磁化の依存性の解析を行い, 実験結果と比較した。Audio 磁場が静磁場方向に付加されることの影響, 又, 高周波磁場及び Audio 磁場の振幅の試料中における不均一度 (場所的) を考慮すれば, 理論値と実験値とはかなりよく一致することが分った。

3. Solution of the Thomas-Fermi-Dirac-Weizsäcker Equation with a Gradient Correction to the Exchange

片 岡 俊 幸

Kirzhnits の方法に基いて, 一粒子密度行列の \hbar -巾展開を \hbar^2 まで (従って ∇ の 2 次まで) 実行した。この結果を用いて非均質な電子ガスの運動エネルギー及び交換エネルギーに対する勾配補正を導き, 前者は Weizsäcker 補正の $\frac{1}{9}$ に, 後者は Herman 等が別の観点から提案したものと一致することを示した。これ等の勾配補正を組み入れたエネルギー汎関数を用い, 変分原理に従って, 交換項に対する密度勾配補正を含んだ Thomas-Fermi-Dirac-Weiz-

säcker方程式を導き、これを中性の鉄原子に適用して数値計算を実行し、交換エネルギーに対する勾配補正が、電子分布、全エネルギー、圧力等の諸量の振舞いにどのような影響を与えるかを明かにした。

3. 磁場中における圧縮された原子のトーマス・フェルミ理論

南 本 健 治

圧縮状態にある原子の電子状態が、磁場からどのような影響を受けるかを調べるために、Tomishima と Yonei による磁場中原子の Thomas-Fermi 理論を、中性のネオン原子に適用した。 $r = \mu_0 H / \text{Ry} = 1$ の場合について、種々の原子半径にわたって数値計算を実行して、ポテンシャル、電子分布、全エネルギー、圧力、化学ポテンシャル等の諸量を求め、これを磁場の無い場合の結果と比較した。この結果、磁場を加えると、de Haas-van Alphen効果のために、電子分布に振動的構造が現れることのほか、圧力、化学ポテンシャルが共に減少すること、また、その減少の割合は、圧縮度と共に次第に小さくなってゆくこと等の諸特徴が示された。

5. Temperature-Dependent Thomas-Fermi Theory of Atoms in Magnetic Fields

宮 井 玲 夫

Sondheimer-Wilson とは少し異なる観点から、一様な磁場中に於ける、任意温度の電子ガスの自由エネルギー密度に対する表式を導いた。これを原子内多電子系の局所自由エネルギー密度と見なして、原子の自由エネルギー汎関数を構成し、変分原理に基づいて磁場中原子の、温度に依存する Thomas-Fermi 方程式を導き、解の従うべき境界条件について論じた。

また、磁場と温度とが原子の電子状態にどのように影響するかを見るために、低温の極限に於